



TITLE:

固体LiHの金属化圧の計算と状態方程式(大阪大学基礎工学研究科物理系専攻,修士論文題目・アブストラクト(1987年度)その2)

AUTHOR(S):

川上, 展弘

CITATION:

川上, 展弘. 固体LiHの金属化圧の計算と状態方程式(大阪大学基礎工学研究科物理系専攻,修士論文題目・アブストラクト(1987年度)その2). 物性研究 1988, 50(6): 1055-1056

ISSUE DATE:

1988-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93374>

RIGHT:

を作成し、その電気抵抗、AC帯磁率、DC帯磁率を測定した。
 それらの全てはほぼ 90K 付近で抵抗がゼロになった。RE イオンの
 有効磁矩の大きさはフリーな RE³⁺ イオンのそれとほぼ同じであった。また
 比熱等の測定によれば (Nd, Sm, Gd, Dy, Ho, Er, Yb) を含むものは
 それらの RE イオンのモーメントが低温でオーダーすることがわっている。
 しかし AC 帯磁率の結果によると 30mK まで完全マイスター効果が維持さ
 れている。よって磁気的な整列と超伝導は共存しており、このことから
 YBa₂Cu₃O_{7-δ} の構造において Y (RE) site の原子は超伝導に
 寄与していないものと考えられる。

固体 LiH の金属化圧の計算と状態方程式

川上 展弘

固体 LiH の衝撃波状態方程式 (Hugoniot) 及び圧力下における非金属～
 金属転移の転移圧を密度汎関数法に基づいて計算を行う。固体 LiH は常圧
 で B1 (NaCl 型) 構造の比較的バンド・ギャップの小さな (4.99 eV) の絶縁
 体であり、Marsh の衝撃波実験によると ~45 GPa で相転移を示さない。常
 圧下における格子定数の計算値 (rigid lattice) と実験値の比較を Ta-
 ble I に示す。零点振動の効果が無視できないが、計算値は ~3% 小さな値
 を与える。

凝集エネルギーを (分離した原子のエネルギー) - (T=0 K の固体のエ
 ネルギー) と定義すると、凝集エネルギーの計算値は 431 kJ/mole (実験
 値 ~463 kJ/mole) となる。

格子振動を Debye 近似をして、Hugoniot の計算を初めて行った。LiH の
 Hugoniot の実験との比較を Fig. 1 に示す。計算結果は、~10% 低い圧力を与
 えるが、傾向としては、かなり合っている。

金属転移圧の計算は、Beringer ($P_H=3.5$ TPa, $V_H=0.34$ cm³/mole) 及
 び、Vaisnys & Zmuidzinas ($P_H=110$ GPa, $V_H=5.0$ cm³/mole) があるが、
 前者は band closing mechanism を fcc He と同一 (W-L) と仮定していて、ま
 た、後者は古典的な Herzfeld 理論を用いて評価している。そこで、APW 法
 を使って、圧力下における電子状態を計算し、両者と異なる結果を得た
 ($P_H=226$ GPa, $V_H=3.35$ cm³/mole)。band gap の圧力変化を Fig. 2 に示す。

また、B1 (NaCl 型) 構造 ~ B2 (CsCl 型) 構造転移についても議論したいと思
 う。

	a(83K) ^a	a(0K) ^b
⁶ LiH	4.0666	4.0615
⁷ LiH	4.0657	4.0610
⁶ LiD	4.0499	4.0425
⁷ LiD	4.0477	4.0415
⁷ LiT	4.0403	4.0340
Calc. (rigid lattice)	3.927	

^a Ref. 15^b Extrapolated to T=0K

Table 1

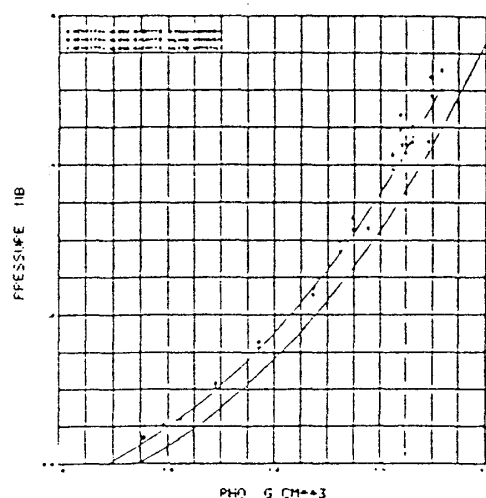


Fig.1

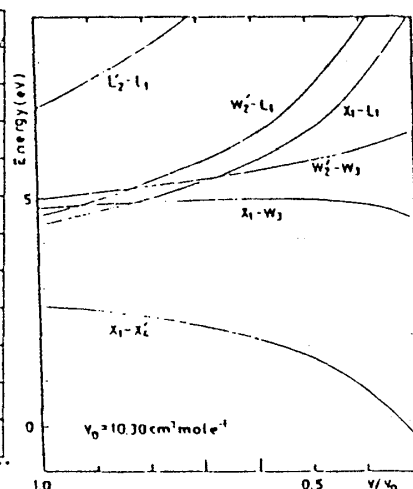


Fig.2

Y系高温超伝導体の⁵⁷Fe Mössbauer効果

北川 英夫

T_cが90K級の酸化物高温超伝導体YBa₂Cu₃O_{7-δ}が発見されて以来、その物性研究は超伝導の発現機構の解明とも関連して数多く行われている。本研究は、⁵⁷Feをドーブした酸化物高温超伝導体YBa₂(Cu_{1-x}Fe_x)₃O_{7-δ}の⁵⁷Feメスbauer測定を行い、Feの存在状態及びFeをプローブとしてこの酸化物の物性を微視的に調べることを目的としている。

試料はYBa₂(Cu_{1-x}Fe_x)₃O_{7-δ}, X=0.018-0.15であり、結晶構造やT_cはすでに調べられていて、高温から徐冷したX=0.018, 0.02では斜方晶、それ以上のFe濃度では正方晶、また急冷試料では高温の正方晶である。T_cはFe濃度が増加すると共に低下するが、X=0.01でもなお超伝導を示す。急冷試料は半導体であり、超伝導体と同様に測定を行い比較した。特に、スペクトルの温度依存性を詳細に調べた。

超伝導体である全ての試料の室温でのスペクトルは、四極子分裂が2mm/sec. (D-1成分)、1mm/sec. (D-2)、0.5-0.3mm/sec. (D-3)である3種類のダブルットに分離することが出来、少なくとも3種類のFeが存在していることが分かった。D-3成分は明らかにhigh-spinのFe³⁺であり、他の2種類のFeは明らかにそれとは